Index

Commentationes

Pagina

BAIRD, N. C., and M. A. WHITEHEAD, Ionic Character 259
BASU, RAMA (née BHATTACHARYA), SCF CI Calculation of the electronic spectra of nitroso and nitro benzene 87
—, SCF CI Calculation of the Electronic Spectra of Cis and Trans Isomers of Stilbene and Azo-Benzene 215
BIRSS, F. W., and W. G. LAIDLAW, On the Empirical Validity of Koopmans' Theorem 186
—, see LAIDLAW, W. G. 181
BURNELLE, L., Nature of the Chemical Bonds in HCN and C_2N_2 177

CERTAIN, PH. R., V. S. WATTS, and J. H. GOLDSTEIN, ^{13}C-H Coupling Constants and Maximum Overlap Orbitals in Some Three-Membered Heterocyclic Compounds . . 324
CHUN, H.-U., s. HARTMANN, H. 1
ČÍŽEK, J., see KOUTECKÝ, J., J. DUBSKÝ, and K. HLAVATÝ 462

DIJKGRAAF, C., Davydov Splitting in the Polarized Absorption Spectra of Single Crystals of some Copper Complexes of α-Amino Acids 422
DONCKT, E., VANDER, voir NASIELSKI, J., ... 22
DUBSKÝ, J., see KOUTECKÝ, J., J. ČÍŽEK, and K. HLAVATÝ 462

EZUMI, K., see MATAGA, N., and Y. TORIHASHI 158

FLEISSNER, M., s. HARTMANN, H. u. H. SILLESCU 63
FRAGA, S., Non-Relativistic Self-Consistent-Field Theory. I. 403
—, Non-Relativistic Self-Consistent-Field Theory. II. 406
—, Non-Relativistic Self-Consistent-Field Theory. III. 411
—, see MCCLUNG, R. E. D. 416

GLIEMANN, G., Über die Aufspaltung des d-Niveaus in Komplexen kubischer Symmetrie 285
GOLDSTEIN, J. H., see CERTAIN, PH. R., and V. S. WATTS 324
GOODWIN, T. H., and D. A. MORTON-BLAKE, A Simple Molecular-Orbital Study of the β-, α-, and p-Bands in Triphenylenes 75
—, Valency-Bond Studies of Some Conjugated Hydrocarbons. V. Naphthalene . . . 315

HARCOURT, R. D., Valency Structures for N_2O_4 437
HA, T.-K., s. HARTMANN, H. 14
—, s. HARTMANN, H. 473
HARTMANN, H., u. H.-U. CHUN, Die Bestimmung der Bindungsenergien der 1 s-Elektronen der leichten Elemente aus ihren Absorptionsspektren im ultraweichen Röntgengebiet 1
—, u. T.-K. HA, Berechnung der Röntgen- und Auger-Linien des Methans mit Hilfe des Pseudo-Neon-Modells 14
—, u. W. MOSCH, Über das Pseudo-Neon-Modell des Berylliumkarbidkristalls. Eine Absolutberechnung von Kristalleigenschaften 29
—, M. FLEISSNER und H. SILLESCU, Untersuchung der Quadrupolkopplung in salzsaurem trans-Dichloro-diäthylendiamin-kobalt(III)-chlorid 63
—, u. H. SILLESCU, Kernquadrupolkopplung in einigen Kobalt(III)komplexen 371
—, u. T.-K. HA, Errata: Berechnung der Röntgen- und Auger-Linien des Methans mit Hilfe des Pseudo-Neon-Modells. Diese Zeitschrift, **2**, 14—21 (1964) 473
HEILBRONNER, E., see E. WELTIN, E., and J.-P. WEBER 114
—, see SIMONETTA, M. 228
HLAVATÝ, K., see KOUTECKÝ, J., J. ČÍŽEK, and J. DUBSKÝ 462

Pagina

I'Haya, Y., see Ito, H. 247
Ito, H., and Y. I'Haya, The Electronic Structure of Naphthalene 247

Julg, A., voir Pujol, L. 125
—, Le problème de la réduction des intégrales électroniques dans la méthode L.C.A.O. améliorée 134
—, et A. Pellégatti, Recherches théoriques sur la structure électronique de molécules contenant des atomes hybridés en sp: I: Acétylène, diacétylène, azote 202
— —, Recherches théoriques sur la structure électronique de molécules contenant des atomes hybridés en sp: II: La molécule C_3 210
— —, Recherches théoriques sur la structure électronique de molécules contenant des atomes hybridés en *sp*: III: Vinylacétylène, divinylacétylène, butatriène 396

Kawasaki, Y., see Mataga, N., and Y. Torihashi 168
Koutecký, J., J. Čížek, J. Dubský, and K. Hlavatý, The Effect of the Choice of Parameters on the Order of Energy Levels of Benzene Calculated in the π-Electron Approximation by the Configuration Interaction Method Including Double- and Triple-Excited Configurations 462

Laidlaw, W. G., and F. W. Birss, Koopmans' Theorem and Virtual Orbital Energies in the General SCF Theory 181
—, see Birss, F. W. 186
Longstaff, J. V. L., and K. Singer, A Survey of Gaussian Two-electron Functions. I. The Ground State of the Helium Atom 265

Malrieu, J.-P., et B. Pullman, Sur les propriétés électroniques de la phénothiazine et de son radical 293
— —, Configuration spatiale et propriétés électroniques du noyau d'isoalloxazine 302
Maréchal, Y., et A. Witkowski, Couplage d'exciton triplet avec les mouvements des noyaux 453
Mataga, N., Y. Torihashi, and K. Ezumi, Electronic Structures of Carbazole and Indole and the Solvent Effects on the Electronic Spectra 158
—, Y. Kawasaki, and Y. Torihashi, On the Mechanism of Proton Transfer Reactions in the Excited Hydrogen Bonded Complexes 168
McClung, R. E. D., and S. Fraga, Non-Relativistic Self-Consistent Field-Theory. IV. 416
Moreau, C., et J. Serre, Structure électronique du fluoroacétylène et du chloroacétylène 40
Morton-Blake, D. A., see Goodwin, T. H. 75
Mosch, W., s. Hartmann, H. 29

Nasielski, J., et E. vander Donckt, Propriétés physico-chimiques de composés à caractère aromatique IX. Mise en évidence de complexes de transfert de charge entre des dérivés N-méthylés monoaza-aromatiques et des hydrocarbures aromatiques 22

Ohno, K., Some Remarks on the Pariser-Parr-Pople Method 219

Pellégatti, A., voir Julg, A. 202
—, voir Julg, A. 210
—, voir Julg, A. 396
Preuss, H., Zur Definition des effektiven Potentials I 93
—, Zur Definition des effektiven Potentials II 98
—, Eine neue Näherung für die Energiekurven zweiatomiger Systeme 102
—, Die Bestimmung von Energiehyperflächen mehratomiger Systeme nach einer Interpolationsmethode mit Hilfe der Vorstellung der Atomassoziationen. I. Grundgleichungen 344
—, Die Bestimmung von Energiehyperflächen mehratomiger Systeme nach einer Interpolationsmethode mit Hilfe der Vorstellung der Atomassoziationen. II. Die Methode 362
—, u. H.-H. Schmidtke, Die Kernwechselwirkung in der MO-LCAO-Theorie 428
Pujol, L., et A. Julg, Structure électronique du furanne. Méthode L.C.A.O. améliorée 125
Pullman, B., voir Malrieu, J.-P. 293
— voir Malrieu, J.-P. 302

Pagina

RANDIĆ, M., The Splitting of *d*-Orbitals in Less Symmetrical Molecules Containing a Cyclopentadienyl Ligand 468
RE, G. DEL, see VEILLARD, A. 55
RUCH, E., Über Isomorphie bei Punktsymmetrien 193
—, u. A. SCHÖNHOFER, Über zugeordnete Funktionen 332

SCHMIDTKE, H.-H., Zum Valenzwinkelproblem einfacher Moleküle 84
—, s. PREUSS, H. 428
SCHÖNHOFER, A., s. RUCH, E. 332
SCROCCO, E., and J. TOMASI, An Interpretation of the Nuclear Quadrupole Coupling Constant for the HCl Molecule on the Basis of an "Ab Initio" Calculation 386
SERRE, J., voir MOREAU, C. 40
SILLESCU, H., s. HARTMANN, H. und M. FLEISSNER 63
—, s. HARTMANN, H. 371
SIMONETTA, M., and E. HEILBRONNER, Valence Bond Treatment of Systems involving Orbital Degeneracy. Part I: Topologically linear Ions 228
SINGER, K., see LONGSTAFF, J. V. L. 265

TOMASI, J., see SCROCCO, E. 386
TORIHASHI, Y., see MATAGA, N., and K. EZUMI 158
—, see MATAGA, N., and Y. KAWASAKI 168

VEILLARD, A., and G. DEL RE, Hybridization in Cyclopropane, Cyclobutane and Cubane 55

WAGNIÈRE, G., An Attempt to Predict the Relative Resonance Stabilization of Some Non Benzenoid π-electron Systems with the Perimeter Model 281
WATTS, V. S., see CERTAIN, PH. R., and J. H. GOLDSTEIN 324
WEBER, J.-P., see WELTIN, E., and E. HEILBRONNER 114
WELTIN, E., J.-P. WEBER, and E. HEILBRONNER, A Simplified Version of the Pariser-Parr-Pople Treatment of π-Electron Systems 114
WHITEHEAD, M. A., see BAIRD, N. C. 259
WILLETT, R. D., Chemical Valence in SF_4 and SF_4O 393
WITKOWSKI, A., voir MARÉCHAL, Y. 453

Recensiones

DEWAR, M. J. S., Hyperconjugation (Ref. J. W. LINNETT) 86
PARR, R. G., The Quantum Theory of Molecular Electronic Structure (Ref. H. v. HIRSCHHAUSEN) 258

SPRINGER-VERLAG / WIEN · NEW YORK

Proceedings of the 8th International Conference on Coordination Chemistry

Vienna, September 7th—11th, 1964

Edited by

V. Gutmann

Technical University of Vienna

Mit 45 Abbildungen. XV, 449 Seiten. Gr.-8°. 1964

(149 Beiträge in englischer, 14 Beiträge in deutscher Sprache und 1 Beitrag in französischer Sprache)

Steif geheftet DM 62.60

Coordination Chemistry covers all branches of chemistry. Many new coordination compounds are synthesized namely in the field of organometallic compounds. Analytical interest is still increasing in coordination phenomena in solution. The catalytic properties of certain coordination compounds are of importance in polymerisation reactions, hydrogenation and oxidation reactions, and indeed involved in many biochemical reactions. The Proceedings of 8 I. C. C. C. contain the long abstracts of the papers presented at the 8th International Conference on Coordination Chemistry in Vienna, September 1964 (all by invitation) and thus gives a survey about modern coordination chemistry.

Zu beziehen durch Ihre Buchhandlung

SPRINGER-VERLAG
BERLIN · GÖTTINGEN · HEIDELBERG · NEW YORK

Springer Tracts in Natural Philosophy

Fortsetzung der „Ergebnisse der angewandten Mathematik"

Volume 2

Edited by C. Truesdell. Co-Editors: L. Collatz, G. Fichera, M. Fixman, P. Germain, J. Keller, A. Seeger

Differential- und Integral-Ungleichungen

und ihre Anwendung bei Abschätzungs- und Eindeutigkeitsproblemen

Von **Wolfgang Walter**

o. Professor der Mathematik an der Technischen Hochschule Karlsruhe

Mit 18 Abbildungen
XII, 269 Seiten Gr.-8°. 1964
Ganzleinen DM 59,—

Inhaltsübersicht: Bezeichnungen. Einleitung. — Volterra-Integralgleichungen: Abschätzungen bei monotonen Kernen. Bemerkungen zum Existenzproblem; Maximal- und Minimalintegrale. Verallgemeinerung des Monotoniebegriffs. Abschätzungs- und Eindeutigkeitssätze. Gewöhnliche Differentialgleichungen (im Sinne von CARATHÉODORY). Systeme von Integralgleichungen. Abschätzung von Systemen mit K-Normen. — Gewöhnliche Differentialgleichungen: Grundlegende Sätze über Differential-Ungleichungen. Abschätzungssätze für das Anfangswertproblem bei einer gewöhnlichen Differentialgleichung erster Ordnung. Eindeutigkeitssätze. Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen; Abschätzung durch K-Normen. Systeme von Differential-Ungleichungen. Komponentenweise Abschätzung bei Systemen. Weitere Eindeutigkeitsaussagen für Systeme. Differentialgleichungen höherer Ordnung. Ergänzungen. — Volterra-Integralgleichungen in mehreren Veränderlichen. Hyperbolische Differentialgleichungen: Abschätzung mit monotonen Operatoren. Existenzsätze. Abschätzung für Integralgleichungen. Die hyperbolische Differentialgleichung $u_{xy} = f(x, y, u)$. Die Differentialgleichung $u_{xy} = f(x, y, u, u_x, u_y)$. Ergänzungen; Die lokale Beweismethode. — Parabolische Differentialgleichungen: Bezeichnungen. Das Lemma von NAGUMO-WESTPHAL. Das erste Randwertproblem. Das Maximum-Minimum-Prinzip; Spezielle Ansätze. Gestaltaussagen. Unendliche Gebiete, unstetige Anfangswerte, Aufgaben ohne Anfangswerte. Die Wärmeleitung als Beispiel. Anwendung auf die Grenzschichttheorie. Die dritte Randwertaufgabe. Systeme von parabolischen Differentialgleichungen. Eindeutigkeitsfragen bei parabolischen Systemen. Verallgemeinerungen und Ergänzungen; Die instationären Grenzschicht-Gleichungen. — Literaturverzeichnis. — Namen- und Sachverzeichnis.

■ **Bitte Prospekt anfordern!**

SPRINGER-VERLAG
Berlin
Göttingen
Heidelberg

SPRINGER-VERLAG
Wien

Wir haben eine Firma in den Vereinigten Staaten von Nordamerika gegründet:

Springer-Verlag New York Inc.
175 Fifth Avenue
New York, N.Y. 10010

Sie hat Anfang September ihre Tätigkeit aufgenommen. Die Leitung wurde unserem langjährigen Prokuristen Herrn G. Holtz übertragen.

Springer-Verlag New York Inc. soll den Kontakt zu unseren Autoren in den USA pflegen und insbesondere auch die Verbreitung unserer seitherigen und zukünftigen europäischen Verlagsproduktion auf dem amerikanischen Kontinent fördern.

HEIDELBERGER TASCHENBÜCHER

Eine neue Reihe

Leitfäden, Grundrisse und Monographien in moderner Form

SPRINGER-VERLAG
Berlin · Göttingen · Heidelberg

Niedriger Preis · Gute Ausstattung
Handliches Format

Soeben erschienen:

Die Relativitätstheorie Einsteins
Von Prof. Dr. Max Born, Bad Pyrmont, unter Mitarbeit von Dr. Walter Biem, Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München. 4. Auflage. Mit 143 Abb. Etwa 360 Seiten. 1964. DM 10,80

Einführung in die Physik der Atome
Von Dr. phil. K. H. Hellwege, ord. Prof. für technische Physik an der Technischen Hochschule Darmstadt. 2., erweiterte Auflage. Mit 80 Abb. VIII, 162 Seiten. 1964. DM 8,80

Virus und Molekularbiologie
Eine elementare Einführung. Von Prof. Dr. rer. nat. et med. Wolfhard Weidel, Max-Planck-Institut für Biologie, Tübingen. 2., erweiterte Auflage. Mit 26 Abb. VIII, 160 Seiten. 1964. DM 5,80

Demnächst erscheinen: Penrose / Einführung in die Humangenetik.
Stocker / Ziegler / Grundriß der Botanik. Zähner / Biologie der Antibiotica.

Bitte fragen Sie Ihren Buchhändler

SPRINGER-VERLAG
Berlin · Göttingen · Heidelberg

Theoretica Chimica Acta

Die Zeitschrift erscheint im Interesse rascher Veröffentlichung nach Maßgabe des eingehenden Materials zwanglos in Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Der Preis des Bandes beträgt DM 48,—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

In order to avoid delay in publication, this journal is issued at indefinite intervals, according to the material received, and consists of loose numbers, for subsequent assembly in volumes The price is DM 48.— per volume.

Special attention is drawn to the fact that sole copyright for all languages and countries is transferred to the publishers immediately the manuscript is accepted and published by them. It is a fundamental condition that no manuscript submitted shall have been or will be published elsewhere either at home or abroad.

Unless special permission has been granted by the publishers, no photographic reproductions, microfilms, microphotos or other reproductions of a similar nature may be made of the journals, of individual contributions contained therein or of extracts therefrom.

The reproduction of registered names, trade marks, etc. in this journal, even if not specially indicated, does not warrant the assumption that such names, as defined by the laws affecting protection of trade marks, etc., may be regarded as uncontrolled and therefore for the free use of everybody.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît à intervalles non réguliers, dans la mesure des articles reçus, sous forme de fascicules séparés qui seront reliés en volumes. Le prix de chaque volume est de 48 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscrit accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que les ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. . . ., des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis par la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

Pagina

HARTMANN, H., und H. SILLESCU, Kernquadrupolkopplung in einigen Kobalt(III)-komplexen 371

SCROCCO, E., and J. TOMASI, An Interpretation of the Nuclear Quadrupole Coupling Constant for the HCl Molecule on the Basis of an "Ab Initio" Calculation 386

WILLETT, R. D., Chemical Valence in SF_4 and SF_4O 393

JULG, A., et A. PELLÉGATTI, Recherches théoriques sur la structure électronique de molécules contenant des atomes hybridés en *sp*: III: Vinylacétylène, divinylacétylène, butatriène 396

FRAGA, S., Non-Relativistic Self-Consistent-Field Theory. I. 403

—, Non-Relativistic Self-Consistent-Field Theory. II. 406

—, Non-Relativistic Self-Consistent-Field Theory. III. 411

MCCLUNG, R. E. D., and S. FRAGA, Non-Relativistic Self-Consistent-Field Theory. IV. 416

DIJKGRAAF, C., Davydov Splitting in the Polarized Absorption Spectra of Single Crystals of some Copper Complexes of α-Amino Acids 422

PREUSS, H., und H.-H. SCHMIDTKE, Die Kernwechselwirkung in der MO-LCAO-Theorie 428

HARCOURT, R. D., Valency Structures for N_2O_4 437

MARÉCHAL, Y., et A. WITKOWSKI, Couplage d'exciton triplet avec les mouvements des noyaux 453

KOUTECKÝ, J., J. ČÍŽEK, J. DUBSKÝ and K. HLAVATÝ, The Effect of the Choice of Parameters on the Order of Energy Levels of Benzene Calculated in the π-Electron Approximation by the Configuration Interaction Method Including Double- and Triple-Excited Configurations 462

RANDIĆ, M., The Splitting of *d*-Orbitals in Less Symmetrical Molecules Containing a Cyclopentadienyl Ligand 468

HARTMANN, H., u. T.-K. HA, Errata: Berechnung der Röntgen- und Auger-Linien des Methans mit Hilfe des Pseudo-Neon-Modells. Diese Zeitschrift, **2**, 14—21 (1964) . 473

Springer-Verlag, Berlin · Göttingen · Heidelberg · New York
Druck: Carl Ritter & Co., Wiesbaden
Printed in Germany